

Ακριβείς κβαντομηχανικοί υπολογισμοί έδωσαν τις ακόλουθες τιμές για το δυναμικό V συναρτήσει της απόστασης r μεταξύ δύο μοριακών συστημάτων (για την ακρίβεια, των CO_2 και C_6H_6):

r (Å)	V (kcal/mol)	r (Å)	V (kcal/mol)
2.8	1.403	3.8	−2.304
3	−1.188	4	−1.988
3.2	−2.470	4.2	−1.668
3.4	−2.633	4.4	−1.374
3.6	−2.560	4.6	−1.117

Επιθυμούμε να προσεγγίσουμε το πραγματικό $V(r)$ με το εμπειρικό δυναμικό Lennard–Jones:

$$V_{LJ} = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6} .$$

Εφαρμόστε με κατάλληλο τρόπο τη μέθοδο ελάχιστων τετραγώνων για να υπολογίσετε τους συντελεστές A , B στο V_{LJ} .

Υπόδειξη: Να θέσετε $x = 1/r^6$ και να προσαρμόσετε στα δεδομένα το πολυώνυμο $V(x) = Ax^2 - Bx$.